



TITLE:

金属のPauli帯磁率の自由電子モデルからのズレII

AUTHOR(S):

川村, 清

CITATION:

川村, 清. 金属のPauli帯磁率の自由電子モデルからのズレII. 物性研究
1965, 4(6): 464-471

ISSUE DATE:

1965-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85804>

RIGHT:

金属の Pauli 帯磁率の自由電子モデルからのズレ II

(8月5日 受理)

川 村 清 (東大理)

1. 先に述べたように¹⁾、金属の Pauli 帯磁率 χ と自由電子のそれ χ_0 との比は、

$$\chi/\chi_0 = (m^*/m_0)/(1+B_0) \quad (1)$$

で与えられる。ここに m_0 は自由電子の質量、 m^* は多体効果を繰り込んだ、電子の有効質量である。Landau の correlation function³⁾ を Fermi 面上で

$$f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = Z^{-1} \Sigma_1(2l+1) \{ A_1 + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}') B_1 \} \quad (2)$$

と展開した。 Z は Fermi 面上での quasi particle の状態密度。

(1) は厳密な表式であるが、実際に定量的に扱うには、何らかの近似計算をしなくてはならない。ここに、その一つの例を示そう。

2. よく知られているように²⁾、quasi-particle のエネルギーは

$$E - \epsilon_p - \text{Re } \Sigma_p^R(E) = 0 \quad (3)$$

の解として与えられる。ここで ϵ_p は自由電子のエネルギー、 $\Sigma_p^R(E)$ は運動量 \mathbf{p} energy E の電子の self-energy part である。(3)の解を $E_\sigma(\mathbf{p})$ とする。 $E_\sigma(\mathbf{p})$ は運動量 \mathbf{p}' , スピン σ' の quasi-particle の分布 $n_{\sigma'}(\mathbf{p}')$ が変化すると、それに応じて変化する。その変分係数を Landau は "correlation function" と呼んだ。(3)の両辺を $n_{\sigma'}(\mathbf{p}')$ で変分をとり、

$$\frac{\partial E_\sigma(\mathbf{p})}{\partial n_{\sigma'}(\mathbf{p}')} \left(1 - \frac{\partial \Sigma_{\sigma\sigma'}^R(E)}{\partial E} \right) \Big|_{E=E_\sigma(\mathbf{p})} = \frac{\partial \Sigma_{\sigma\sigma'}^R(E)}{\partial n_{\sigma'}(\mathbf{p}')} \quad (4)$$

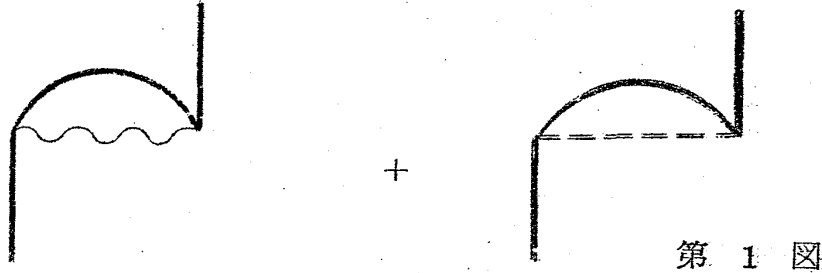
したがって correlation function は

$$f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \equiv \frac{\partial E_\sigma(\mathbf{p})}{\partial n_{\sigma'}(\mathbf{p}')} = a \frac{\partial \text{Re } \Sigma_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}, E)}{\partial n_{\sigma'}(\mathbf{p}')} \Big|_{E=E_\sigma(\mathbf{p})} \quad (5)$$

$$a = \left[1 - \frac{\partial}{\partial E} \operatorname{Re} \Sigma_{\sigma}(\mathbf{p}, E) \Big|_{E=E_{\sigma}(\mathbf{p})} \right]^{-1} \quad (6)$$

と書ける。

self-energy part としては、第 1 図のグラフのようなものを選ぶ。第一図で二重の点線は、screened Coulomb 相互作用，波線は phonon-line



第 1 図

を表わす。これを、thermal Green 関数を使って式で書けば次の様になる。

$$\Sigma_{\mathbf{p}}(\epsilon_n) = -T \sum_{\mathbf{p}', n'} \left\{ \frac{v(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{\epsilon(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \epsilon_n - \epsilon_{n'})} + D_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}(\epsilon_n - \epsilon_{n'}) \right\} \quad (7)$$

但し

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

$$D_{\mathbf{q}}(\omega_m) = |\alpha_{\mathbf{q}}|^2 \left(\frac{1}{\omega_m - \omega_{\mathbf{q}}} - \frac{1}{\omega_m + \omega_{\mathbf{q}}} \right) \quad (8)$$

$\alpha_{\mathbf{p}}$ は、electron-phonon 相互作用の行列要素である。(7)の第一項の誘電率を、static なものでおきかえて

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathbf{p}}^R(\epsilon) = a \Sigma_{\mathbf{q}} [|\alpha_{\mathbf{q}}|^2 \left\{ \frac{1 - f(E_{\mathbf{p}-\mathbf{q}})}{\epsilon - E_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} - a\omega_{\mathbf{q}} + i\delta} - \frac{f(E_{\mathbf{p}-\mathbf{q}})}{\epsilon - E_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + a\omega_{\mathbf{q}} + i\delta} \right\} \\ - \frac{v(\mathbf{q})}{\epsilon(\mathbf{q})} f(E_{\mathbf{p}-\mathbf{q}})] \end{aligned} \quad (9)$$

3. 次に self-energy part と correlation function の関係を考える。

(9)を(5)に代入すると、

$$f_{\sigma\sigma'}^{(p)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_{\sigma\sigma'}^{(p)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') + f_{\sigma\sigma'}^{(c)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \quad (10-a)$$

$$f_{\sigma\sigma'}^{(p)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2a}{\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}} |\alpha_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2 \delta_{\sigma\sigma'} \quad (10-b)$$

川村 清

$$f_{\sigma\sigma'}^{(c)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -a^2 \frac{v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (10-c)$$

今の場合、exchange diagramのみをとつたので、 $\delta_{\sigma\sigma'}$ という factor が
 かつた。(10) の様な形は、Nozier-Luttinger⁴⁾ の一般論の特殊なものである。

次に、有効質量 m^* を、correlation function であらわすことを考える
 (3)から、($\nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}) = \mathbf{p}/m^*$ として)

$$a^{-1} \frac{\mathbf{p}}{m^*} - \frac{\mathbf{p}}{m} - \nabla_{\mathbf{p}} \Sigma_{\mathbf{p}}^R(E) |_{E=E_{\mathbf{p}}} = 0 \quad (11)$$

よく知られているように(9)の第一項は、 E にのみ依存し、 \mathbf{p} にはほとんど依らない⁵⁾。また第二項は E には依らない。そこで、

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{p}} \Sigma_{\mathbf{p}}^R(E) |_{E=E_{\mathbf{p}}} &= -a \Sigma_{\mathbf{p}'} (\nabla_{\mathbf{p}} \frac{v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}-\mathbf{p}')}) f(E_{\mathbf{p}'}) \\ &= -a \Sigma_{\mathbf{p}'} \frac{v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \frac{\mathbf{p}'}{m^*} \frac{\partial f(E_{\mathbf{p}'})}{\partial E_{\mathbf{p}'}} \end{aligned} \quad (12)$$

また(9)から

$$\frac{\partial \Sigma_{\mathbf{p}}^R(E)}{\partial E} |_{E=E_{\mathbf{p}}} = -Z \int \frac{dx}{4} \left(\frac{2|\alpha_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2}{\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}} \right) \quad (13)$$

右辺の \mathbf{p}, \mathbf{p}' はそれぞれ Fermi 面上にあり、 $x = \cos \theta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ とおいている。(10)
 を(2)の様に展開することにより、

$$\frac{\partial \Sigma_{\mathbf{p}}^R(E)}{\partial E} = - \frac{A_0^P}{a}$$

これと(6)とから

$$a = 1 - A_0^P \quad (14)$$

(12), (14)を(11)に代入して、両辺と \mathbf{p} の内積を求めると、

$$\frac{1}{m^*} \frac{1}{1-A_0^P} \left\{ 1 + \Sigma_{\mathbf{p}'} \frac{v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}-\mathbf{p}')} \cos \theta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{\partial f(E_{\mathbf{p}'})}{\partial E_{\mathbf{p}'}} \right\} = \frac{1}{m} \quad)$$

(10) を使うと,

$$m^*/m = (1 + A_1^C) / (1 - A_0^P) \quad (15)$$

(15) で $A_0^P = 0$ とおくと

$$m^*/m = 1 + A_1^C \quad (16)$$

となり, Landau 理論と一致し, また $A_1^C = 0$ とすると,

$$m^*/m = 1 / (1 - A_0^P) \quad (17)$$

で, Prange-Kadanoff の結果と一致する⁵⁾

4. これまで, static な誘電率 $\epsilon(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ を explicit には考えなかつたが, correlation function を計算する為には, これも近似的に与えておかななくてはならない。低温でありさえすれば, electron-phonon 相互作用があつても, Landau の kinetic equation は成立する。それを解くと⁶⁾

$$\epsilon(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = 1 + 3 \left(\frac{m \omega_p}{p_F |\mathbf{p}-\mathbf{p}'|} \right)^2 \frac{m^*/m}{1 + A_0^C}$$

これと (10) とから,

$$f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_{\sigma\sigma'}^{(C)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') + f_{\sigma\sigma'}^{(P)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \quad (18)$$

$$f_{\sigma\sigma'}^{(C)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -a^2 \frac{4 \pi e^2 \delta_{\sigma\sigma'}}{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')^2 + q_{TF}^2 (m^*/m) \sqrt{1 + A_0^C}} \quad (19)$$

$$f_{\sigma\sigma'}^{(P)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2a}{\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}} |\mathbf{p}-\mathbf{p}'|^2 \delta_{\sigma\sigma'} \quad (20)$$

(19) から

$$\begin{aligned} \psi^C(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= \varphi^C(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \\ &= -a^2 \frac{2 \pi e^2}{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')^2 + q_{TF}^2 (m^*/m) / (1 + A_0^C)} \end{aligned} \quad (21)$$

5. (20) は, electron-phonon 相互作用の行列要素が与えられれば, 一意的に計算されるものである。しかし, 今後は $A_0^{Ph} \equiv \lambda$ とおいて, これを

川村 清

parameter にとる。(21)は、 A_0, A_1, \dots の non-linear な連立方程式になっている。(21)を(2)の様に、Legendre 展開すると、

$$\begin{aligned} A_0^C &= -\frac{\alpha r_S}{2\pi} \frac{m^*}{m} (1-\lambda)^2 \ln \left[1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} \frac{1+A_0^C}{m^*/m} \right] \\ A_1^C &= \frac{\alpha r_S}{\pi} \frac{m^*}{m} (1-\lambda)^2 \left[1 - \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\alpha r_S}{\pi} \frac{m^*/m}{1+A_0^C} \right\} \right. \\ &\quad \times \ln \left\{ 1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} \frac{1+A_0^C}{m^*/m} \right\} \left. \right] \end{aligned} \quad (22)$$

(22)で $\lambda=0$ とおくと Watabe⁷⁾ の式である。

$$1 + A_0^C = u, \quad 1 + A_1^C = v$$

とおくと (22) から

$$u = 1 - \frac{\alpha r_S}{2\pi} (1-\lambda) v \ln \left[1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} (1-\lambda) \frac{u}{v} \right] \quad (23-a)$$

$$\begin{aligned} v &= 1 + \frac{\alpha r_S}{\pi} (1-\lambda) v \left[1 - \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\alpha r_S}{\pi} \frac{v}{(1-\lambda)u} \right\} \right. \\ &\quad \times \ln \left\{ 1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} (1-\lambda) \frac{u}{v} \right\} \left. \right] \end{aligned} \quad (23-b)$$

(23) から

$$v = \frac{(1-\lambda) u^2}{\left\{ (1-\lambda) - \frac{\alpha r_S}{\pi} [2 + (1-\lambda)^2] \right\} u + \frac{2\alpha r_S}{\pi}} \quad (24)$$

(23), (24) を連立させて、 u, v を求めればよい。

6. 上の方程式を数値的に解く前に、 A_0^C の λ -依存性を調べて見ることは有益である。(22) の最初の方程式から、

$$\begin{aligned} \frac{dA_0^C(\lambda)}{d\lambda} &= -\frac{\alpha r_S}{2\pi} \left[\frac{d}{d\lambda} \frac{m^*}{m} (1-\lambda)^2 \right] \\ &\quad \times \ln \left[1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} \frac{1+A_0^C}{m^*/m} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} \frac{m^*}{m} (1-\lambda)^2 \frac{1}{1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} \frac{1+A_0^C}{m^*/m}} \end{aligned}$$

$$\times \left[\frac{d}{d\lambda} \frac{1 + A_0^C}{m^*/m} \right] \quad (25)$$

第一項は、quasi-particle が相互作用の potential を“感じる”程度の変化をあらわす。

$$\frac{d}{d\lambda} \left[-\frac{m^*}{m} (1-\lambda)^2 \right] = \frac{d}{d\lambda} (1 + A_1^C) (1-\lambda) \cong -1 \quad (26)$$

ここで $A_1^C \ll 1$ を使った (このことは、後に示す)。(26) は、phonon の衣を着た電子は相互作用作用に対して“鈍感”になることを表わす。(25) の第二項は、screening constant の変化が correlation function に与える影響である。

$$\begin{aligned} \frac{1 + A_0^C}{(m^*/m)} &= \frac{m}{m^*} - \frac{\alpha r_S}{2\pi} (1-\lambda)^2 \\ &\times \ln \left[1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} \frac{1 + A_0^C}{m^*/m} \right] \end{aligned} \quad (27)$$

より

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{1 + A_0^C}{m^*/m} \right) &\cong \left\{ \frac{\alpha r_S}{\pi} (1-\lambda) \ln \left(1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} \frac{1 + A_0^C}{m^*/m} \right) - 1 \right\} \\ &\times \left\{ 1 + \frac{1}{2} (1-\lambda)^2 \frac{1}{1 + \frac{\pi}{\alpha r_S} \frac{1 + A_0^C}{m^*/m}} \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (28)$$

(28) の分母は正である。分子は、(22) から

$$-2A_0^C \frac{m}{m^*} \frac{1}{1-\lambda} - 1 \cong -1 - 2A_0^C < 0$$

すなわち phonon の存在で Fermi 面の状態密度が増加し、それが screening constant を大きくして、correlation function の絶対値を小さくすることに寄与するのである。

7. 実際に、方程式 (23) を解くと、次の数値が得られた。ただし、 u, v の相対誤差は 1% 内外である。($\lambda = 0$ は Watabe⁷⁾ の値) Na では $r_S \cong 4$ で $m^*/m \sim 1.27$ ⁸⁾, $\chi/\chi_0 \sim 1.7$ ⁹⁾ が測定されている。

第 1 表

 $r_s = 2$

λ	u	v	$1+A_0$	m^*/m	χ/χ_0
0.0	0.80	0.96	0.80	0.98	1.20
0.1	0.83	0.97	0.93	1.08	1.16
0.2	0.86	0.97	1.06	1.21	1.14
0.3	0.88	0.99	1.18	1.41	1.19
0.4	0.91	0.99	1.21	1.65	1.36

 $r_s = 3$

λ	u	v	$1+A_0$	m^*/m	χ/χ_0
0.0	0.77	0.96	0.77	0.96	1.25
0.1	0.80	0.97	0.90	1.08	1.20
0.2	0.83	0.97	1.03	1.21	1.17
0.3	0.86	0.97	1.16	1.38	1.19
0.4	0.89	0.98	1.29	1.63	1.26

 $r_s = 4$

λ	u	v	$1+A_0$	m^*/m	χ/χ_0
0.0	0.76	0.97	0.76	0.97	1.28
0.1	0.78	0.95	0.88	1.06	1.20
0.2	0.81	0.95	1.01	1.18	1.17
0.3	0.85	0.94	1.15	1.34	1.16
0.4	0.88	0.97	1.28	1.61	1.26

しかし、 m^*/m として、1.3 近くをとると、上の計算の結果では $\chi/\chi_0 \sim 1.2$ と、Watabe の結果より、一層実験値からはずれてくる。すなわち、self-energy part として、第 1 図の様なものを入れて、Coulomb correlation と electron-phonon 相互作用をあわせ考えて見ると、（実際の金属では両方の効果が同時に効いている！！）定量的に実験と合わないばかりか、定性的にもますます実験値からはずれるという様なことになってしまう。したがって今までの議論は、何か、それを採り入れることによつて、結果が実験値に近づ

くような効果を考えおとしていると思われる。Watabe⁷⁾は、第1図のグラフに vertex correction をほどこすことによつて、その効果が期待出来ることをとを示唆しているが、そのことについては、次の機会にゆずとうと思う。

文 献

- 1) 川村 清：物性研究 vol 311 (1965)
- 2) 例えば、Abrikosov, Gorkov and Dzyalohivskii "Method of quantum field theory in statistical Physics"
- 3) L.D. Landau: Soviet Phys. JETP. 3 920 (1957)
- 4) J.M. Luttinger and P. Nozières: Phys. Rev. 127 1431 (1962)
- 5) L.E. Prange and L.P. Kadanoff: Phys. Rev. 134 A566 (1964)
- 6) S. Misawa: Prog. Theor. Phys., 30 786 (1963)
- 7) M. Watabe: Prog. Theor. Phys., 29 519 (1963)
- 8) D.L. Martin: Phys. Rev., 124 438 (1961)
- 9) R.T. Schumacher and W.E. Vehse; J. Phys. Soc. Japan 17 Supplement B-1 (1962) p.460.